研究会報告

22. 量子スピン系の長距離秩序の存在証明

東工大理　尾関之康　西森秀稔　富田靖浩
筑波大物理　久保健　岸達也

1. はじめに

量子スピン系の低温における長距離秩序(LRO)の存在を厳密に証明しようとする試みは古くから行われている。スピン系のLROの存在証明には有名な「Peierlsの方法」があるが、これは離散的な対称性の破れを伴う秩序にのみ有効で、 Heisenberg模型やXY模型のような連続対称性の破れを伴う秩序の証明には適用する事ができない。本報告では、そのような場合にも有効な「Infrared Boundsの方法」と呼ばれる証明法を用いる。この方法は元々Fröhlich *et. al.*[1]によって古典系に導入されたもので、その後Dyson, Lieb and Simon(ＤＬＳ)[2]によって量子系に拡張された。ＤＬＳ理論は有限温度の秩序に限られていたが、 Jordão Neves and Fernando Perez[3]はこの方法が基底状態の秩序にも有効である事を示した。

最近、高温超伝導の基礎機構がその磁気的性質に関係している可能性のある事が指摘され、[4] 二次元量子反強磁性Heisenberg模型の基底状態に興味が集まるようになった。一方ＤＬＳ理論は格子や相互作用に対する制限が厳しく、例えば、強磁性の系（XY模型を除く）には適用できない。そこで、以下では主に ν 次元hypercube上の最近接相互作用反強磁性XXZ模型

$$H = \sum_{\alpha}\sum_{m=1}^{\nu} \left(S^x_\alpha S^x_{\alpha+\delta_m} + S^y_\alpha S^y_{\alpha+\delta_m} + \varDelta\, S^z_\alpha S^z_{\alpha+\delta_m}\right) \tag{1}$$

を扱う事にする。ただし、α は格子点の位置 δ_m は基本並進ベクトルである。 $\varDelta=0,1,\infty$ はそれぞれ、XY模型、Heisenberg模型、Ising模型に相当している。これらのモデルに現れる秩序はいわゆるNeel秩序で、

$$\lim_{\varLambda\to\infty} <\{|\varLambda|^{-1}\sum_{\alpha}(-1)^\alpha S^j_\alpha\}^2> \; > 0 \tag{2}$$

のとき j成分のLROが存在するものと見なす。 $|\varLambda|^{-1}\sum_\alpha(-1)^\alpha S^j_\alpha$ はスタガード磁化と呼ばれる量である。 XXZ模型のLROの証明の詳細については、文献[5-11]を参考にされると良い。

2. 証明法

この章では簡単に証明の手順を述べる。 (2)式を証明するには、左辺の下限を評価してそれが正である事を示せば良い。そのためにまず次のようなsum ruleを利用する。[7,9]

$$<S^j_\alpha S^j_{\alpha+\delta}> \;=\; \nu^{-1}|\varLambda|^{-1}\sum_p g^{(j)}_p \sum_{m=1}^{\nu}\cos p_m \tag{3}$$

$$g^{(j)}_p \equiv <\hat{S}^j_p \hat{S}^j_{-p}> \tag{4}$$

ただし、$\hat{S}^j_p \equiv |\varLambda|^{-1/2}\sum_\alpha e^{-ip\cdot\alpha} S^j_\alpha$ である。 (3)式の右辺の和で $p=(\pi,\pi,\ldots)\equiv Q_\nu$ に対応する項

のみを抜き出すと、

$$<(|\Lambda|^{-1}\sum_{\alpha}(-1)^{\alpha}S_{\alpha}^{j})^{2}> = -<S_{\alpha}^{j}S_{\alpha+\delta}^{j}> - |\Lambda|^{-1}\sum_{p\neq \mathrm{Q}_{\nu}} g_{p}^{(j)}\,(-\nu^{-1}\sum_{m=1}^{\nu}\cos p_{m}) \quad (5)$$

になり、(2)式の右辺と同じ成分が得られる。仮に与えられたΛの系の相関関数$g_p^{(j)}$の上限を厳密に評価でき、それが$\overline{g}_p^{(j)}$で与えられるならば、(5)式の両辺において$\Lambda\to\infty$の極限をとることにより、(2)式の十分条件として次式が得られる。

$$-<S_{\alpha}^{j}S_{\alpha+\delta}^{j}> - \int^{(+)}\frac{\mathrm{d}^{\nu}p}{(2\pi)^{\nu}}\,\overline{g}_{p}^{(j)}\,(-\frac{1}{\nu}\sum_{m=1}^{\nu}\cos p_{m}) > 0 \quad (6)$$

ただし、(+)は被積分関数が正の部分のみを積分する事を意味する。

DLSはΛの系の$g_p^{(j)}$の上限が

$$(\hat{S}_{p}^{j}, \hat{S}_{-p}^{j}) \leq \beta^{-1}B_{p}^{(j)} \quad (7)$$

$$<[\hat{S}_{p}^{j}, [\beta H, \hat{S}_{-p}^{j}]]> \leq \beta\, C_{p}^{(j)} \quad (8)$$

を満たす関数$B_p^{(j)}$、$C_p^{(j)}$によって

$$g_{p}^{(j)} \leq \overline{g}_{p}^{(j)} = \frac{1}{2}(B_{p}^{(j)}C_{p}^{(j)})^{1/2}\coth[\frac{\beta}{2}(C_{p}^{(j)}/B_{p}^{(j)})^{1/2}] \quad (9)$$

と評価できる事を示した。ただし(,)は、Duhamel two-point function

$$(A,B) = Z^{-1}\int_{0}^{1}\mathrm{Tr}(\mathrm{e}^{-x\beta H}A\mathrm{e}^{-(1-x)\beta H}B)\mathrm{d}x \quad (10)$$

であり、Zは分配関数、$\beta=1/k_{\mathrm{B}}T$である。 $C_p^{(j)}$は容易に計算する事ができて、(8)式が等号として、

$$C_{p}^{(j)} = \begin{cases} -2\sum_{m=1}^{\nu}(1-\Delta\cos p_{m})<xx>-2\sum_{m=1}^{\nu}(\Delta-\cos p_{m})<zz> & (j=x,y) \\ -4\sum_{m=1}^{\nu}(1-\cos p_{m})<xx> & (j=z) \end{cases} \quad (11)$$

となる。ただし$<jj>\equiv<S_{\alpha}^{j}S_{\alpha+\delta}^{j}>$である。一方、$B_p^{(j)}$の評価はそれほど容易ではない。ここまでの議論には格子や相互作用にほとんど制限がつかない。しかし、$B_p^{(j)}$すなわち$(\hat{S}_{p}^{j}, \hat{S}_{-p}^{j})$の上限を評価するためには、Reflection Positivityと呼ばれる対称性が要求され、そのために、格子にはBondを垂直二等分する対称面が必要、相互作用は反強磁性のみ、等の制限がつく。詳細は文献に譲るが$B_p^{(j)}$は $p\neq Q_{\nu}$のとき

$$B_{p}^{(j)} = \begin{cases} \{2\sum_{m=1}^{\nu}(1+\cos p_{m})\}^{-1} & (j=x,y) \\ \{2\Delta\sum_{m=1}^{\nu}(1+\cos p_{m})\}^{-1} & (j=z) \end{cases} \quad (12)$$

になる。(6)、(9)、(11)、(12)によってLROの条件は、最近接相関$\langle jj\rangle$とp_mに関する積分で表現できる事が判った。

一般に$\coth x \leq 1+x^{-1}$なので、

$$\overline{g_p^{(j)}} \leq \frac{1}{2}(B_p^{(j)}C_p^{(j)})^{1/2} + \beta^{-1}B_p^{(j)} \tag{13}$$

が成立する。よって、$T\to 0$の極限では$g_p^{(j)}$の上限は$(B_p^{(j)}C_p^{(j)})^{1/2}/2$になり、これは一般に有限であるから以上の議論は$T=0$でも有効である事が判る。[3] このときのLROの十分条件は

$$-<jj> - \int^{(+)}\frac{d^\nu p}{(2\pi)^\nu}\,\frac{1}{2}(B_p^{(j)}C_p^{(j)})^{1/2}\,(-\frac{1}{\nu}\sum_{m=1}^{\nu}\cos p_m) > 0 \tag{14}$$

である。また、(13)式から、積分$\int^{(+)}\frac{d^\nu p}{(2\pi)^\nu}B_p^{(j)}$が有限ならば、(14)式は有限温度でLROの存在する十分条件になる事も判る。この積分は、$\nu\geq 3$で収束する。

3. XXZ模型のLRO

具体的にLROが存在するか否かを判定するには、(14)式に現れる相関関数の下限（または上限）を評価し、積分を実行しなければならない。以下、簡単のためにz成分のLROのみを扱う。x成分については、z成分の議論とほぼ同じなので結果のみを述べる。詳しくは文献[6,9-11]を参照されたい。$j=z$のとき(14)式は、(11)-(12)式を使って

$$-<zz> - \left[\frac{-<xx>}{2\Delta}\right]^{1/2}\Gamma_\nu > 0 \tag{15}$$

になる。ただしΓ_νは

$$\Gamma_\nu = \int^{(+)}\frac{d^\nu p}{(2\pi)^\nu}\left[\frac{\sum(1-\cos p_m)}{\sum(1+\cos p_m)}\right]^{1/2}(-\frac{1}{\nu}\sum\cos p_m) \tag{16}$$

で定義され、$\Gamma_2=0.646$、$\Gamma_3=0.350$である。

まず、古典系との対応からz成分LROが期待される　$\Delta\geq 1$すなわちIsing-likeな領域について考察する。$C_p^{(j)}$が一般に正の実数である事と(11)式から、この領域では

$$-<zz> \geq -<xx> \geq 0 \tag{17}$$

が成立する。さらに、(17)式から1bond当りの基底エネルギーe_gが

$$-<zz> \geq \frac{-e_g}{(2+\Delta)} \tag{18}$$

を満たし、z成分のNeel状態エネルギーとの比較から

$$e_g \leq -\Delta S^2 \tag{19}$$

が成立するので、(15)式の十分条件として

$$S^2 > \frac{2+\Delta}{2\Delta^2}\Gamma_\nu^2 \tag{20}$$

が得られる。(20)式は、$\nu=3$のとき任意の$S\geq 1/2$と$\Delta\geq 1$について、　$\nu=2$のとき$S\geq 1$では全ての$\Delta\geq 1$について、$S=1/2$では$\Delta>1.78$の場合に満たされる。

上の結果は、二次元の$S=1/2$ Heisenberg($\Delta=1$)近傍のみ証明が欠如している。この$\nu=2$, $S=1/2$の結果については改良が可能である。まず、適当な変分関数によってe_gの上限をより良い変分エネルギーe_vで置き換えて、(19)の不等式を改善する。[10] 次に、与えられたΔ (≥ 1)における相関関数$\langle xx\rangle$と$\Delta=1$における$\langle xx\rangle_H$との関係

$$-\langle xx\rangle \geq -\langle xx\rangle_H \tag{21}$$

を利用する。さらに(18)式に代えて

$$-\langle zz\rangle = \frac{2\langle xx\rangle - e_g}{\Delta} \geq \frac{2\langle xx\rangle_H - e_v}{\Delta} \tag{22}$$

を用いれば、LROの存在条件として

$$\frac{2\langle xx\rangle_H - e_v}{\Delta} > \left(\frac{-\langle xx\rangle_H}{2\Delta}\right)^{1/2}\Gamma_2 \tag{23}$$

が得られる。(23)式を判定するには$\langle xx\rangle_H$の下限が必要だが、$\langle xx\rangle_H=e_g/3$に注意すれば、必要なのは基底エネルギーの下限である事が判る。文献[11]では、Anderson流の評価法[12]を拡張して$\langle xx\rangle_H\geq -0.11895$を導き、$\Delta>1.67$まで改良した。また、∞系と有限系の相関関数に関して

$$-\langle xx\rangle \leq -\langle xx\rangle_\Lambda \tag{24-a}$$

$$-\langle zz\rangle \geq -\langle zz\rangle_\Lambda \tag{24-b}$$

を仮定すると$\Delta>1.1$まで存在条件が満たされる。(24)の仮定は$|\Lambda|=20$までの数値計算では正しいので、もっともらしい仮定と言える。

同様の議論がXY-like領域（$0\leq\Delta\leq 1$）でのx成分LROについても行う事ができ、$\nu=3$のとき任意の$S\geq 1/2$と$\Delta\leq 1$について、$\nu=2$のとき$S\geq 1$では全ての$\Delta\leq 1$について、$S=1/2$では$\Delta<0.20$の場合にLROの存在が証明された。また、(24)式と同様の仮定を行えば$\Delta<0.59$まで満たされる。

本章のここまでの議論は主軸方向のLRO（Ising-like領域でのz成分LRO等）についてだが、それ以外の成分、例えばXY-like領域でのz成分LROは存在するだろうか。古典的なイメージではそのような事は有り得ない。これを確かめるには、(15)式を$\Delta<1$の領域で判定すれば良い。[10] ただし(17)-(19)式はここでは使えないので、代わりにx成分のNeel状態エネルギーを利用して得られる不等式

$$-\langle zz\rangle \geq \frac{S^2+2\langle xx\rangle}{\Delta} \tag{25}$$

を使って(15)式の十分条件を次のように導く。

$$-16\langle xx\rangle \;<\; \Delta\,\Gamma_\nu^{\,2}+8S^2-\Gamma_\nu\sqrt{\Delta\,(\Delta\,\Gamma_\nu^{\,2}+16S^2)} \tag{26}$$

(26)式を判定するには$\langle xx\rangle$の下限が必要であるが、$\Delta<1$ではこの評価は難しい。ただし$\Delta=1$ではAndersonの評価 $\langle xx\rangle\geq -S(S+1/2\nu)/3$ が使えるので、(26)式は

$$\frac{16}{3}S(S+\frac{1}{2\nu}) \;<\; \Gamma_\nu^{\,2}+8S^2-\Gamma_\nu\sqrt{\Gamma_\nu^{\,2}+16S^2} \tag{27}$$

となり、$\nu=2$では$S\geq 3/2$で、$\nu=3$では$S\geq 1$で満たされる。(27)式の右辺はΔに関して連続なので、相関関数$\langle xx\rangle$が$\Delta=1$で連続ならば、$\Delta<1$のあるΔ_cまでz成分LROが存在すると結論できる。ただし$\langle xx\rangle$の$\Delta=1$での連続性については、それを疑問視するような数値計算の結果[13]も報告されているので、結論は出せない。同様の議論はIsing-like領域におけるx成分LROについても可能である。

4.まとめ

量子反強磁性XXZ模型についてLROの存在が証明された領域をまとめる。$\nu\geq 3$では、任意のSとΔについて有限温度での存在が証明された。四次元以上はここでは議論していないが、これについては容易に示すことができる。[2] $\nu=2$では基底状態のLROの存在が、$S\geq 1$の任意のΔで証明された。$S=1/2$では、$0\leq\Delta<0.2$と$\Delta>1.67$で証明された。$\Delta=1$の近傍は、未だ証明がなされていない。

本報告では、hypercube上のXXZ模型に限って議論したが、「Infrared Boundsの方法」を利用してXYZ模型や蜂の巣格子上のXXZ模型のLROも可能である。[10,14]

参考文献

1) J. Fröhlich, B. Simon and T. Spencer: Comm. Math. Phys., **46**(1976)167.
2) F. Dyson, E. H. Lieb and B. Simon: J. Stat. Phys., **18**(1978)335.
3) E. Jordão Neves and J. Fernando Perez: Phys. Lett., **114**A(1986)331.
4) P. W. Anderson: Science, **235**(1987)1196.
5) K. Kubo: Phys. Rev. Lett., **61**(1988)110.
6) H. Nishimori, K. Kubo, Y. Ozeki, Y. Tomita and T. Kishi: J. Stat. Phys., (to be published).
7) T. Kennedy, E. H. Lieb and B. Shastry: J. Stat. Phys., (to be published).
8) T. Kennedy, E. H. Lieb and B. Shastry: Phys. Rev. Lett., **61**(1988)2582.
9) K. Kubo and T. Kishi: Phys. Rev. Lett., **61**(1988)2585.
10) Y. Ozeki, H. Nishimori and Y. Tomita: J. Phys. Soc. Jpn., **58**(1989)82.
11) H. Nishimori and Y. Ozeki: J. Phys. Soc. Jpn., (to be published).
12) P. W. Anderson: Phys. Rev., **83**(1951)1260.
13) T. Barnes, D. Kotchan and E. S. Swanson: preprint.
14) I. Affleck, T. Kennedy, E. H. Lieb and H. Tasaki: Comm. Math. Phys., **115**(1988)447.